

Санкт-Петербургский государственный университет
Кафедра теории систем управления электрофизической аппаратурой

Калантаевский Денис Эдуардович

Выпускная квалификационная работа бакалавра

**Моделирование трехмерной динамики пучков
заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ с учетом
взаимодействия**

Направление 010900

Прикладная математика и физика

Научный руководитель
кандидат физ. мат. наук,
доцент
Козынченко В.А.

Санкт-Петербург
2016

Содержание

1	Введение	2
2	Постановка задачи	4
3	Обзор литературы	5
4	Ускоритель с ПОКФ	6
5	Уравнения движения	9
6	Моделирование динамики заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ	10
6.1	Без учета заряда	11
6.2	Модель шаров	18
6.3	Модель шаров с замораживанием	21
7	Выводы	26
8	Заключение	27

Введение

Современная физическая картина мира была бы невозможна без исследований в области физики элементарных частиц. Эксперименты проводимые в рамках данной науки требуют все более совершенных и мощных ускорителей, на которых можно было бы достичь больших энергий частиц. Например проект NICA¹, реализуемый ОИЯИ в г.Дубна, для своих нужд приобрел два линейных ускорителя с ПОКФ², которые будут использоваться как инжекторы к циклическим ускорителям. Кроме того, помимо фундаментальных исследований, ускорители заряженных частиц нашли применение в лучевой терапии, досмотровых комплексах, широко применяются в радиационных технологиях и в многих других областях человеческой деятельности.

Для промышленных использований, как и для инъекции частиц, главным свойством является хорошее качество пучка. Необходимо получать хорошо сформированные пучки, которые должны иметь заранее определенные характеристики. Например, для инъекции частиц в больший ускоритель необходимы пучки частиц согласованные с каналом, в который они поступают. От этого зависит работа остальной цепочки ускорителей и достижение запланированных энергий. Так и в лучевой терапии. При точечном облучении больных, плохое качество пучка может повлечь за собой не только неэффективность терапии, но и нанести вред здоровью пациента. Возможность реализации в сравнительно небольших размерах, при требовании невысоких энергий, и пригодность для ускорения ионов играют важную роль для обоснования применения ускорителей резонансного типа в науке и технике. К примеру, линейные ускорители с ПОКФ часто используются как инжекторы ионов к более крупным ускорителям. Эта система, которую предложили в 1969 г. В.В. Владимирский, И.М. Капчинский и В.А. Тепляков, практически решила проблему эффективного ускорения пучков ионов, обеспечивая высокий коэффициент захвата частиц (практически 100%) и хорошую фокусировку пучка. Это говорит об актуальности рассмотрения именно данного типа ускорителя в задаче моделирования движения заряженных частиц.

Ввиду растущих требований к ускорителям, растет и спрос на более точное моделирование динамики в нем, потому что она используется для определения допусков, оптимизации и просто проверки предложенной структуры на соответствие требованиям. Аналитические методы расчета пучка зачастую не позволяют учесть многих эффектов действующих на пучок, хотя их часто достаточно для описания основных характеристик. Проблема усугубляется тем, что при ускорении низкоскоростных интенсивных пучков ионов задача учета кулоновских сил становится особенно важной. Тогда для аналитического анализа необходимо получение самосогласованных решений уравнения Власова [6], которое является нелинейным интегродифференциальным уравнением с частными производными, и поддается аналитическому решению только в ограниченном числе распределений частиц в фазовом пространстве.

Часто используемый метод для моделирования объемного заряда пучка, это метод крупных частиц. Он заключается в том, что пучок представляется набором модельных частиц, представляющие собой совокупные характеристики некоторого числа моделируемых частиц. Обычно используют один из следующих методов моделирования взаимодействия частицы и остального пучка. В системе «частица-частица» подсчитывается взаимодействие частицы попарно с остальными частицами. Сила действующая на частицу сила

¹Nuclotron based Ion Collider fAcility

²Поперечно-однородная квадрупольная фокусировка

представляется как суммарная сила со стороны остальных частиц пучка. Эти методы дают наиболее точные результаты при достаточно большом количестве частиц. Методы «частица в ячейке» используют численное решение уравнения Пуассона. Затраты по времени в нем меньше, и дает приближение для потенциала собственного поля пучка.

Метод «частица - частица» является очень требовательным к вычислительным ресурсам ЭВМ, поэтому в данной работе проводится сравнительная характеристика этого метода с его модификацией с помощью компьютерного моделирования трехмерной динамики частиц в разработанной программе. Предложен набор параметров метода, который позволяет получить ускорение, без больших потерь точности.

В главе «Ускоритель с ПОКФ» предложено описание модели линейного ускорителя с ПОКФ, описана структура ускорителя, принцип синхронизма, автофазировки и группировки частиц.

В главе под названием «Уравнения движения» приведены выражения для описания динамики частиц в ускорителе с ПОКФ.

В главе «Моделирование динамики заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ» рассматриваются модели динамики частиц. В первом параграфе обсуждается модель без учета взаимодействия. Приведены результаты численного эксперимента, оговорена применимость модели. Приведены графики распределений и динамики частиц. Выполнено сравнение характера полученной динамики с динамикой, полученной в результате расчета программой написанной на кафедре ТСУЭФА СПбГУ.

Во втором параграфе исследуется метод крупных частиц в стандартной постановке, описывается алгоритм метода. Приведены результаты численного эксперимента в виде графиков распределений частиц на входе и выходе ускорителя и их динамики.

В третьем параграфе исследуется модификация метода крупных частиц, приводятся результаты компьютерного моделирования. Производится сравнительный анализ с методом второго параграфа. Обсуждаются полученные оценки на погрешность и ускорение времени расчета, полученные в результате моделирования. Приводятся графики полученные в результате численного эксперимента.

Постановка задачи

Целью данной работы является исследование и реализация движения заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ с помощью моделей типа «частица - частица» и их сравнительная характеристика. Критерием сравнения будут выступать время работы алгоритмов и отклонение решения модифицированного метода от метода без модификации. Результаты численного моделирования будут представлены в виде графиков.

Задачами данной работы являются:

1. Программная реализация динамики заряженных частиц в структуре с ПОКФ без взаимодействия на основе приведенных формул. Реализация учета заряда методом типа «частица - частица» с помощью модели крупных частиц, и его модификации - модель частиц с замораживанием.
2. Создание компьютерной модели трехмерной динамики пучков заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ учитывающей взаимодействие частиц с использованием указанных методов
3. Проведение численных экспериментов на реализованной модели.
4. Сравнение метода крупных частиц с его модификацией.

Рассматриваемые модели не делают никакого предположения по поводу симметрии пучка, поэтому движение модельных частиц рассматривается в трехмерном пространстве.

Обзор литературы

Проблемы динамики частиц в линейных ускорителях широко освещены в фундаментальных для этой области знания монографиях Капчинского И.М. [1, 2]. Будучи одним из разработчиков структуры с ПОКФ в своих работах он описал принцип жесткой фокусировки, получил выражение потенциала для квадрупольной линзы, систематически изложил проблемы динамики интенсивных пучков и фокусировки в линейных резонансных ускорителях. Проблемы численного моделирования пучков широко рассмотрены в монографии Рошаль А.С. [4]. В частности много места отведено методу крупных частиц для моделирования динамики интенсивных пучков. В учебном пособии Овсянникова Д.А, Свистунова Ю.А.[3] подробно разбираются задачи моделирования движения ионов в линейных ускорителях, принципы функционирования ускорителей с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой, методы моделирование сил объёмного заряда. В книге [6] излагаются математические модели, описывающие динамику пучков заряженных частиц с учетом их взаимодействия на основе уравнений Власова.

Ускоритель с ПОКФ

Для описания принципов работы ускорителя с ПОКФ рассмотрим следующую схему линейного ускорителя:



Рис. 1: Схема линейного ускорителя.

Имеем набор цилиндрических электродов, на которые подается переменное напряжение. Для того чтобы частица ускорялась, необходимо чтобы поле между зазорами меняло свой знак на противоположный за время прохождения частицей электрода. Это делается с помощью выбора частоты ускоряющего поля, вместе с тем, подключение электродов только к двум раздатчикам напряжения позволяет быть уверенным, что ускорившись в первом зазоре частица будет ускоряться и в следующих.

Для обеспечения наилучшего захвата и фокусировки частиц все ускорители проектируются в соответствии с принципами синхронизма, автофазировки и группирования. Поэтому в расчетах важно так же соблюдать эти принципы.

Принцип синхронизма состоит в том, что расстояние L между соседними ускоряющими промежутками периодами должно быть равно пути, которая частица пролетает за пол периода ускоряющего поля:

$$L = \frac{v}{2f}$$

где v – скорость частицы, f – частота ускоряющего поля.

При инжекции в ускоритель пучок представляет собой непрерывный сгусток и в таком случае принцип синхронизма позволяет ускорять частицы которые проходят середины зазоров между электродами в фазе φ_i близкой к 90° . Получается, что руководствуясь только этим принципом энергию могут набирать только частицы находящиеся близко к максимуму поля.

Принцип автофазировки в свою очередь обеспечивает устойчивое резонансное ускорение в широком диапазоне фаз частиц. Оно может быть достигнуто при определенном значении напряжения V_s и связанного с ним значения равновесной фазы φ_s , которые связаны следующим соотношением:

$$eU_i = eU \sin(\varphi_i) \quad (1)$$

где U_m – максимальное напряжение на зазоре, амплитуда вдвое превышает U_s , поэтому значение равновесной фазы $\varphi_s = 30^\circ$. Выражение (1) отвечает приросту кинетической энергии частицы при прохождении зазора. Все частицы проходящие середину зазора будут колебаться около равновесной фазы. Так как ее значение приходится на середину ускоряющей полуволны (Рис.2), то частицы имеющие значение фазы больше равновесной, в момент пролета середины зазора, согласно (1), получают избыток энергии, и следовательно пролетят промежуток и электрод быстрее и на следующем ускоряющем зазоре окажутся уже

позади равновесной частицы. Наоборот с частицами имеющими значение фазы меньше равновесного.

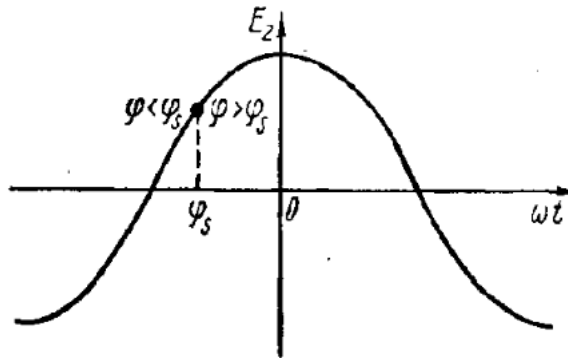


Рис. 2: Положение равновесной фазы на стоячей волне в зазоре.

Совокупное использование принципов синхронизма и автофазировки позволяет ускорить примерно одну шестую часть непрерывного сгустка поступающего на вход ускорителя. Но с помощью *принципа группировки* можно ускорить как минимум половину частиц. Это достигается благодаря тому, что частицы непрерывного сгустка группируются в сгусток фазовой протяженностью 60° . Это можно осуществить с помощью резонатора с одним зазором и пространством дрейфа, где нет никаких внешних сил.

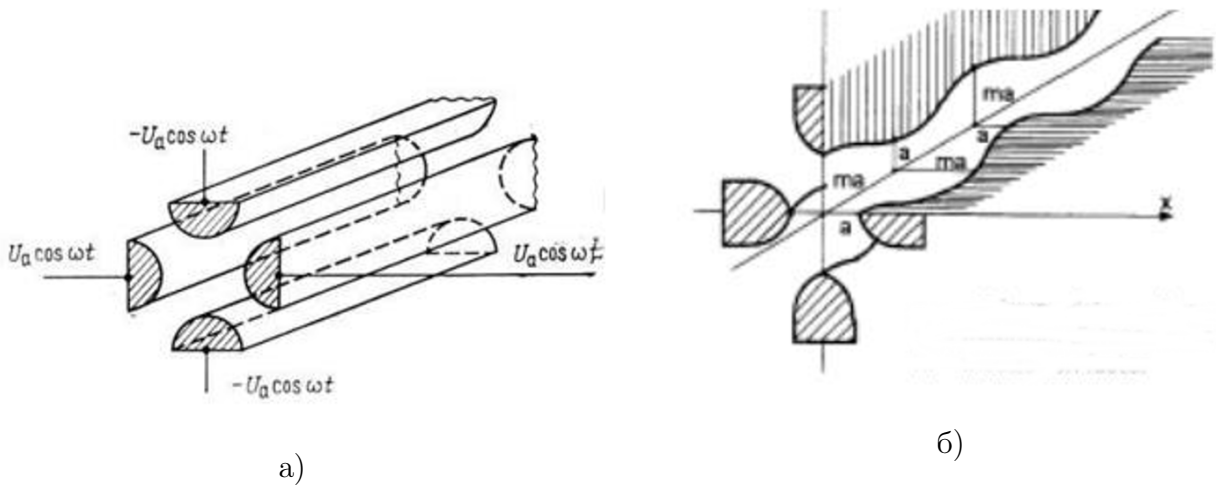


Рис. 3: а) Четырехпроводная линия с квадрупольной симметрией. б) Модулированные электроды. а - минимальное расстояние от электрода до оси, ma - максимум расстояния, m - модуляция. Здесь за счет сдвига соседних электродов, и модуляции расстояния между противоположными электродами, обеспечивается и ускоряющая компонента поля.

Описанные принципы могут быть реализованы в ускоряющем поле резонатора, где ускорение частиц происходит в поле стоячих электромагнитных волн, или волновода, где используются бегущие электромагнитные волны. В качестве линейных резонансных ускорителей ионов обычно используются резонаторы в которых ускорение и фокусировка

осуществляется высокочастотным электрическим полем, образованного четырехпроводной длиной линией с квадрупольной симметрией.

Квадрупольная симметрия здесь обеспечивается равенством модулей напряженности на всех электродах, и противоположностью знаков на соседних электродах. Фокусирующая система выстроенная в таком ускорителе должна иметь явную пространственную периодичность. Модулируются либо знаки электродов, либо их геометрия (Рис.3б). Но если обеспечить переменное во времени напряжение, то можно добиться пространственной однородности структуры (Рис.3а).

Уравнения движения

При моделировании будем рассматривать нерелятивистский случай движения частиц. Это оправдано тем, что ионы обладают сравнительно небольшой скоростью инжекции, и максимальные скорости, достижение которых считается целесообразным в ускорителях с ПОКФ, имеют значение $\beta_z = 0.5 \div 0.6$ от скорости света. А поперечные скорости на несколько порядков меньше продольных скоростей.

Уравнение продольного движения в ускорителе с пространственно-однородной квадрупольной фокусировкой имеют вид [2]:

$$\frac{d^2 z}{d\tau^2} = 4 \frac{eU_L T}{W_0 L} \cos(Kz) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) + F_z \quad (2)$$

$$\tau = ct,$$

z - продольная координата,

U_L - напряжение между электродами,

T - эффективность ускорения,

W_0 - энергия покоя ускоряемой частицы,

L - длина периода,

β - приведенная скорость выделенной частицы,

ϕ_0 - начальная фаза,

c - скорость света,

e - заряд протона,

ν - частота ускоряющего поля,

$$K = \frac{2\pi}{L},$$

F_z - продольная составляющая кулоновской силы пучка.

Уравнения поперечных колебаний частиц отвечающие линейной аппроксимации фокусирующих полей с неоднородной частью в виде силы действующей со стороны частиц пучка[2]:

$$\frac{d^2 x}{d\tau^2} = \left(\frac{eU_L k}{W_0 a^2} + 4\pi \frac{eU_L T}{W_0 L^2} \sin(Kz)\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) x + F_x \quad (3)$$

$$\frac{d^2 y}{d\tau^2} = \left(-\frac{eU_L k}{W_0 a^2} + 4\pi \frac{eU_L T}{W_0 L^2} \sin(Kz)\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) y + F_y \quad (4)$$

a - минимальный радиус структуры на периоде,

$$k = 1 - \frac{4T}{\pi},$$

$\mathbf{F} = (F_x, F_y, F_z)$ - кулоновская сила, действующая на частицу со стороны пучка.

Вычисление сил находящихся в правой части выражений (2) - (4) составляет задачу учета взаимодействия частиц. Количество частиц в пучке порядка $\sim 10^{10}$, поэтому, даже при современном развитии вычислительной техники, нет возможности решить прямую задачу, т.е. описать динамику каждой частицы с учетом взаимодействия с остальными частицами. В этой ситуации применяют разнообразные модели, которые позволяют при разумном использовании вычислительной мощности отследить интересные характеристики динамики пучка и приближенно описать взаимодействие частиц в нем.

Моделирование динамики заряженных частиц в ускорителе с ПОКФ

Для целей данной работы была написана программа на языке C++ реализующая описанные методы и скрипт на языке Python3 реализующий визуализацию полученных результатов с помощью библиотеки matplotlib 1.4.3 . Структура ускоряющей системы импортируется из программы «Спрут» разработанной на кафедре ТСУЭФА СПбГУ. Это позволило пользоваться функционалом связанным с построением структуры и вычислением некоторых ее характеристик. Программа реализующая компьютерную модель не имеет графического интерфейса. Взаимодействие с помощью специальных конфигурационных файлов, которые определяют параметры расчета. На данный момент в программе реализованы методы частиц, метод частиц с замораживанием и модель без заряда.

Во всех расчетах использован ускоритель со следующими параметрами:

Таблица 1: Параметры ускоряющей структуры.

Имя параметра	Значение
Длина структуры	4 м
Частота поля	$433 \cdot 10^6$ Гц
Начальная фаза	-1.5708 рад
Ток I	0.02 А
Тип частиц	Дейтоны
Энергия покоя дейтона	1875 МэВ
Энергия инжекции	0.1 МэВ
Начальная продольная скорость β_z^0	0.010330

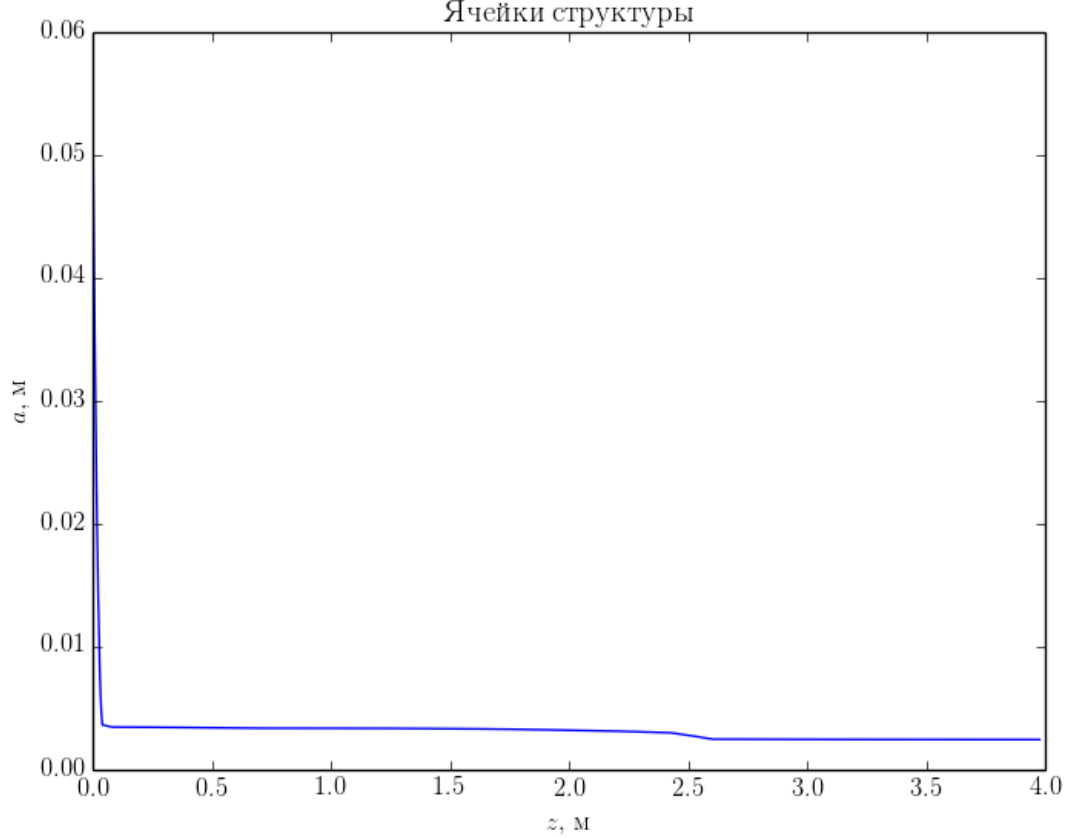


Рис. 4: Распределение ячеек на оси структуры. a – радиус апертуры периода, z – продольная координата.

Без учета заряда

Первая реализованная в программе модель – динамика частиц без учета взаимодействия частиц. В ней не учитывается влияние собственного поля пучка, т.е. частицы испытывают влияние только ускоряющего поля. Эта модель применима для описания слабых, разреженных пучков, где кулоновские взаимодействия между частицами слабы настолько, что ими можно пренебречь. Так же такая модель полезна тем, что позволяет рассчитать аксептанс ускорителя (область в фазовом пространстве, пространственно находящаяся в начале ускоряющей структуры, попав в которую частицы достигают конца ускорителя).

Уравнения (2) - (3) решаются методом Рунге-Кутты 4-го порядка с постоянным шагом. Силы в правой части $\mathbf{F} = \mathbf{0}$, так как здесь мы не учитываем заряд пучка. В качестве начального распределения берется равномерное распределение по поперечным координатам, поперечные скорости нулевые, начальная продольная скорость фиксирована и у всех одинакова (Рис.5 - Рис.6). Из построенной в плоскости (x, y) сетки выбираются точки входящие в эллипс:

$$\frac{x^2}{r_x^2} + \frac{y^2}{r_y^2} = 1 \quad (5)$$

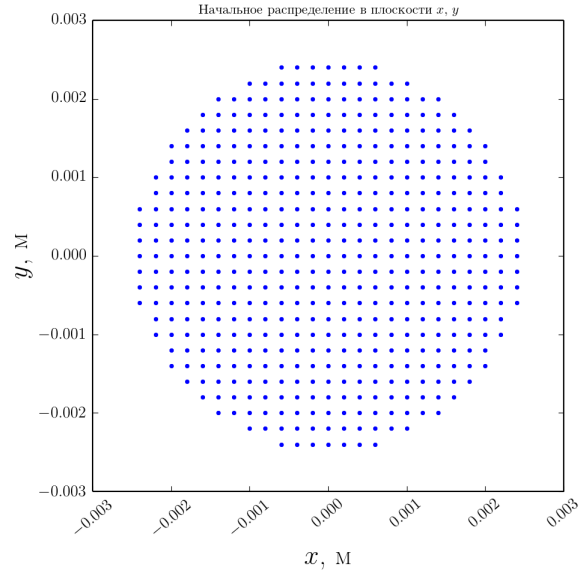
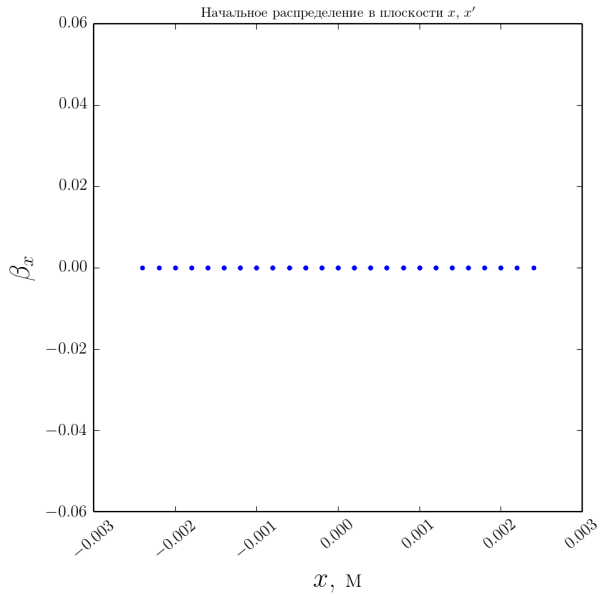
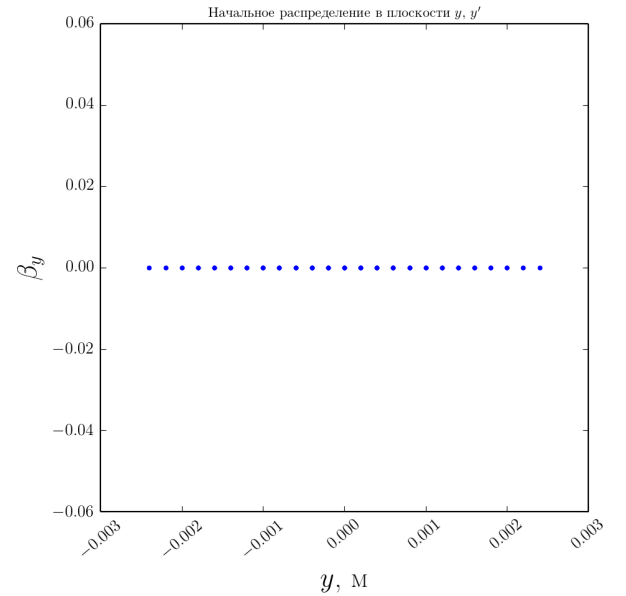


Рис. 5: Начальное распределение частиц с постоянным шагом в плоскости x, y . Количество частиц 489.



а)



б)

Рис. 6: а) Начальное распределение в плоскости x, x' . б) Начальное распределение в плоскости y, y'

Алгоритм расчета:

1. Рассчитывается начальное распределение для заданного эллипса: Частицы находятся в 6-и мерном фазовом пространстве $(x, y, z, \beta_x, \beta_y, \beta_z)$, где β – скорость частицы отнесенная к скорости света c , приведенная скорость. Пусть M – множество точек сетки, где n_x, n_y – количество точек сетки на промежутке $[-r_x, r_x]$ и $[-r_y, r_y]$ соответственно. Шаг сетки будет вычисляться по формуле: $h_x = 2r_x/n_x, h_y = 2r_y/n_y$, тогда $M = \{(x_i, y_j) | x_i = ih_x - r_x, y_j = jh_y - r_y, \text{ где } i, j \in \mathbb{N} \cup \{0\}, i \in [0, n_x], j \in [0, n_y]\}$. Таким образом, поперечные координаты начального распределения это $\forall (x, y) \in M$ и удовлетворяющие неравенству:

$$\frac{x^2}{r_x^2} + \frac{y^2}{r_y^2} \leq 1$$

Остальные координаты фазового пространства задаются следующим образом: $\beta_x = 0, \beta_y = 0, \beta_z = \beta_0$, это распределение копируется по z в первой ячейке, образуя сгустки.

2. Следующий этап вычисления это решение уравнений (2) – (4) методом Рунге-Кутты 4 го порядка. Так как этот метод применяется для решения дифференциальных уравнений первого порядка, а уравнения (2) – (4) имеют второй порядок, поэтому необходимо свести их системе уравнений первого порядка. Поэтому вводим для всех координат функции вида:

$$\beta_x(\tau) = \frac{dx}{d\tau}$$

Получим следующую систему для продольной (6) и поперечной (7) динамики :

$$\begin{cases} \frac{d\beta_z}{d\tau} = 4 \frac{eU_L T}{W_0 L} \cos(Kz) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) \\ \frac{dz}{d\tau} = \beta_z(\tau) \end{cases} \quad (6)$$

$$\begin{cases} \frac{d\beta_z}{d\tau} = 4 \frac{eU_L T}{W_0 L} \cos(Kz) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) \\ \frac{dz}{d\tau} = \beta_z(\tau) \\ \frac{d\beta_x}{d\tau} = \left(\frac{eU_L k}{W_0 a^2} + 4\pi \frac{eU_L T}{W_0 L^2} \sin(Kz)\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) x \\ \frac{dx}{d\tau} = \beta_x(\tau) \\ \frac{d\beta_y}{d\tau} = \left(-\frac{eU_L k}{W_0 a^2} + 4\pi \frac{eU_L T}{W_0 L^2} \sin(Kz)\right) \cos\left(\frac{2\pi\nu}{c}\tau + \phi_0\right) y \\ \frac{dy}{d\tau} = \beta_y(\tau) \end{cases} \quad (7)$$

Тогда на n -ой итерации метод Рунге-Кутты применительно к системе (6) – (7) будет выглядеть следующим образом:

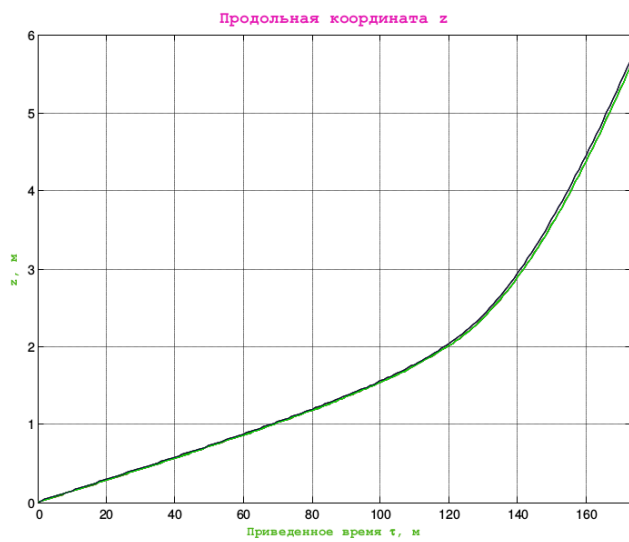
$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_n &= (x_n, y_n, z_n)^T, \boldsymbol{\beta}_n = (\beta_n^x, \beta_n^y, \beta_n^z)^T \\
\mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{x}_n + \frac{1}{6} (\mathbf{k}_1 + 2\mathbf{k}_2 + 2\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4), \boldsymbol{\beta}_{n+1} = \boldsymbol{\beta}_n + \frac{1}{6} (\mathbf{g}_1 + 2\mathbf{g}_2 + 2\mathbf{g}_3 + \mathbf{g}_4) \\
\mathbf{k}_i &= (k_i^0, k_i^1, k_i^2)^T, \mathbf{g}_i = (g_i^0, g_i^1, g_i^2)^T, i = \overline{1, 4} \\
\mathbf{g}_1 &= h\mathbf{f}(t_n, \mathbf{x}_n), \mathbf{g}_2 = h\mathbf{f}\left(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{x}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_1\right) \\
\mathbf{g}_3 &= h\mathbf{f}\left(t_n + \frac{h}{2}, \mathbf{x}_n + \frac{h}{2}\mathbf{k}_2\right), \mathbf{g}_4 = h\mathbf{f}(t_n + h, \mathbf{x}_n + h\mathbf{k}_3) \\
\mathbf{k}_1 &= h\boldsymbol{\beta}_n, \mathbf{k}_2 = h\left(\boldsymbol{\beta}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}_1\right) \\
\mathbf{k}_3 &= h\left(\boldsymbol{\beta}_n + \frac{h}{2}\mathbf{g}_2\right), \mathbf{k}_4 = h(\boldsymbol{\beta}_n + h\mathbf{g}_3)
\end{aligned} \tag{8}$$

Компоненты вектор-функции $\mathbf{f}(t, \mathbf{x}) = (f_x(t, x), f_y(t, y), f_z(t, z))^T$ представляют собой правые части уравнений (2) – (4) соответственно.

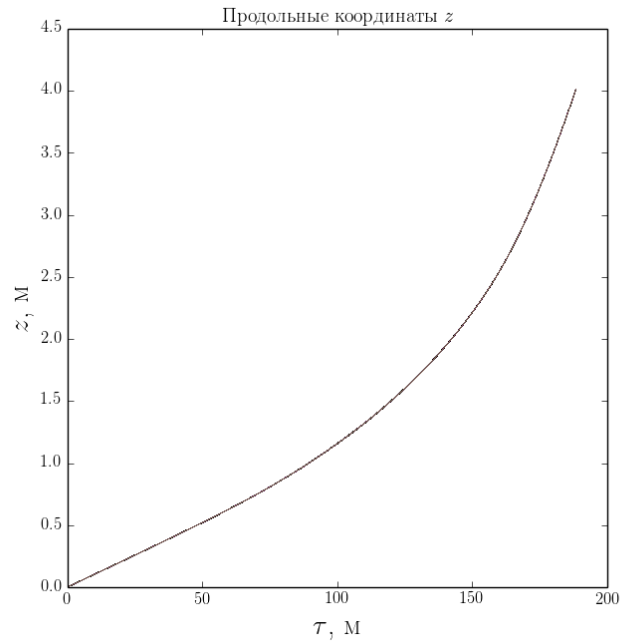
Полученная система уже может быть решена. Стоит отметить, что локальная погрешность метода – $O(h^5)$, а глобальная погрешность равна $O(h^4)$, что является хорошей точностью. Метод Рунге-Кутты широко применяется для решения дифференциальных уравнений. Он не требует знания производных правой части, как метод рядов Тейлора, и легко позволяет менять шаг интегрирования, в отличие от сеточных методов. Но вместе с этим, как видно из (8), в методе 4-го порядка, на каждом временном шаге необходимо четыре раза вычислять правую часть.

3. Системы уравнений (6) - (7) подразумеваются для каждой модельной частицы, и параметры L , eU_L и a зависят от того, на каком ускоряющем промежутке в какой ячейке, находится частица. Для увеличения скорости алгоритма, перед началом расчета выбирается равновесная частица, относительно которой и отслеживается на каком периоде ускорения находятся частицы. Если поперечные координаты частицы превышают радиус апертуры, то частица удаляется из массива.
4. Таким образом, с постоянным временным шагом считается динамика частиц до тех пор, пока равновесная частица не достигнет конца структуры.

О корректности модели свидетельствуют графики получаемые программой «Спрут». Оценивается характер зависимостей, потому что моделирование проводилось при разных параметрах ускорителя. В модели без заряда даже при наличии такого факта, можно охарактеризовать поведение частиц, и выявить качественные нарушения поведения динамики.



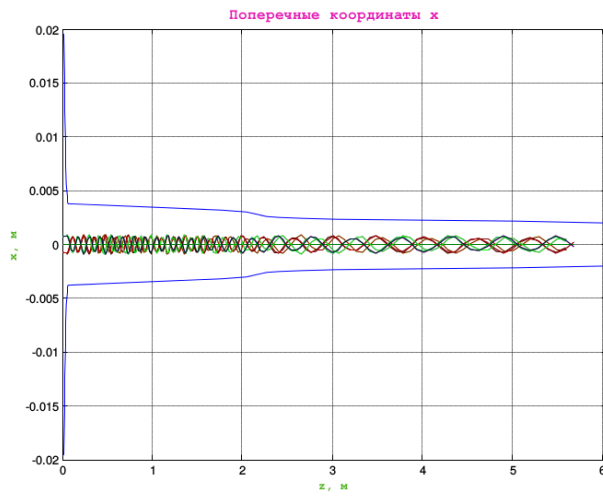
а)



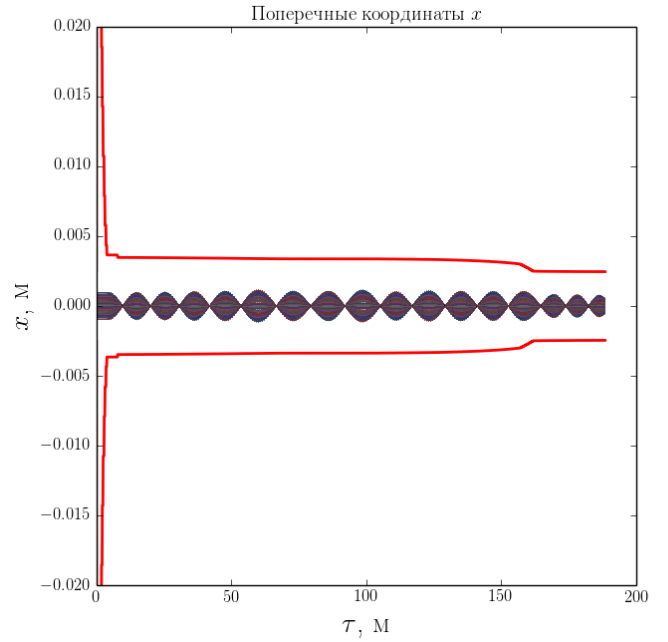
б)

Рис. 7: а) Зависимость продольной координаты частиц от времени «Спрут». б) Зависимость продольной координаты частиц от времени полученная с помощью реализованного.

Результаты (Рис.7) получены при разных распределениях, но видно, что характер зависимости одинаковый. Остается проверить динамику пучка в поперечных координатах.

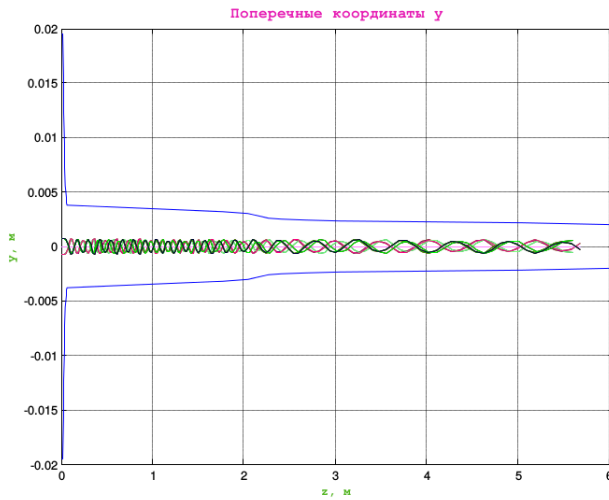


а)

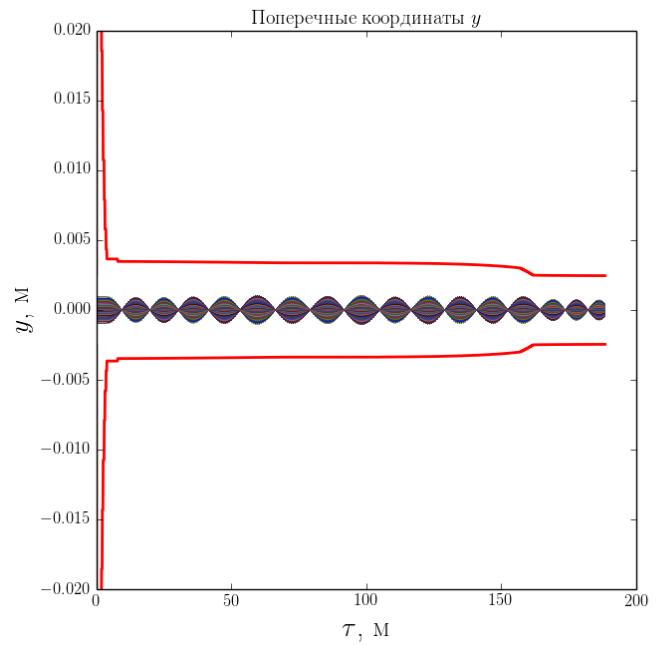


б)

Рис. 8: а) Динамика полученная в программе «Спрут» в координатах x'_z, z . б) Распределение частиц на выходе структуры в плоскости x, x'_τ .



а)



б)

Рис. 9: а) Динамика полученная в программе «Спрут» в координатах y'_z, z . б) Распределение частиц на выходе структуры в плоскости y'_τ, y .

Здесь видно, хотя и не так явно что общий характер зависимости одинаковый. Несмотря даже на разные координаты отложенные по оси абсцисс. Этот факт легко объяснить. Дело в том продольная динамика не зависит от поперечной в данной постановке задачи. И тогда, можно ввести в уравнения (3) - (4) вместо координаты τ можно ввести координату $z(\tau)$. Помимо этого, динамика полученная на Рис.8б и Рис.9б отличается тем, что частицы имеют разные точки пересечения с осью абсцисс. Здесь разница выявляется в отличие распределений – они получены при ненулевых поперечных скоростях. С учетом сказанного считаем что и поперечная динамика выполнена корректно.

Динамика без заряда является основой для моделирования взаимодействия частиц, поэтому важно было проследить за корректностью реализованных алгоритмов.

Модель шаров

Пучок, представляется в виде набора сгустков, периодически расположенных на оси структуры. Каждый сгусток представляется N равномерно заряженными шарами с радиусом R и зарядом вычисляемым по формуле:

$$q = \frac{I\lambda}{cN}$$

Сила, действующая на i -ую частицу со стороны j -ой рассчитывается по формуле [3]:

$$\mathbf{F}_{ij} = \begin{cases} \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2R)^2} \left(\frac{2R}{r_{ij}}\right)^3 \frac{\mathbf{r}_{ij}}{2R} & r_{ij} \geq 2R \\ \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0(2R)^2} \left[2\left(\frac{r_{ij}}{2R}\right)^3 - 9\left(\frac{r_{ij}}{2R}\right) + 8 \right] \frac{\mathbf{r}_{ij}}{2R} & 0 \leq r_{ij} < 2R \end{cases} \quad (9)$$

Таким образом, суммируя силы для каждой частицы получаем влияние на нее остальных частиц сгустка.

$$\mathbf{F}_i = \sum_{ij}^{\mathcal{N}} \mathbf{F}_{ij}$$

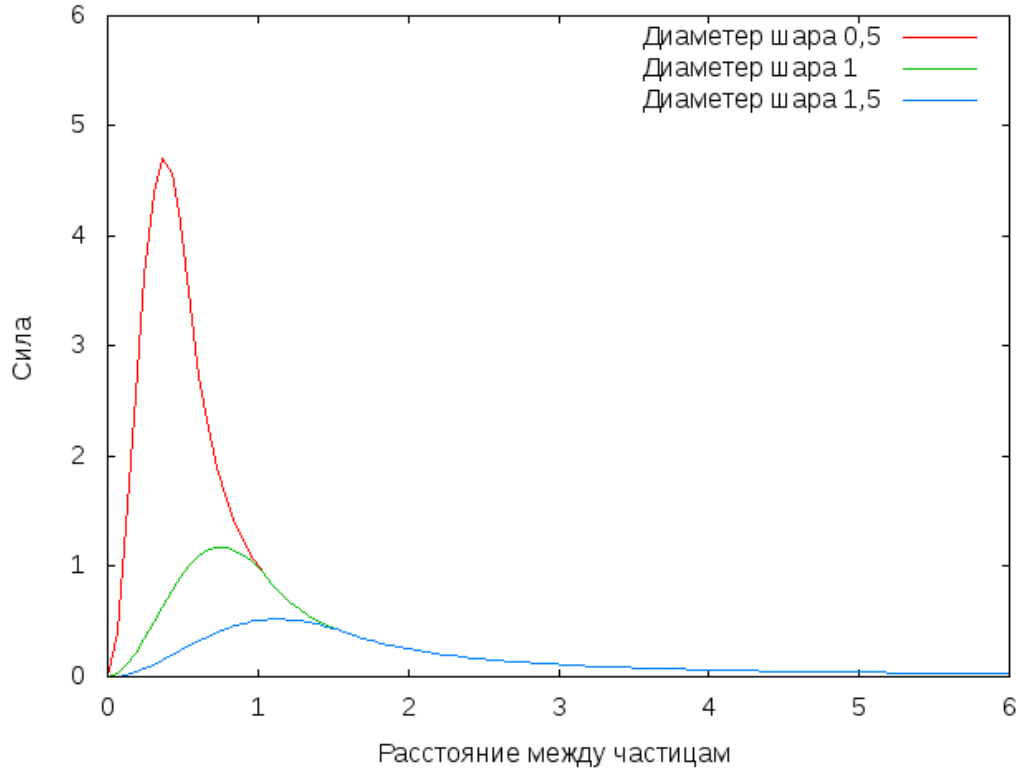


Рис. 10: Графики зависимости силы взаимодействия между модельными частицами в зависимости от расстояния между шарами. Все используемые характеристики – безразмерные, так как зависимости описываются качественно.

Для определения радиуса шара - модельной частицы используется следующий метод. Рассматривается шар радиуса L , который является длиной первой ячейки ускорителя в которую помещается N частиц радиуса R . Центры шаров располагаются в равномерной сетке внутри шара радиуса L . Напряженность равномерно заряженного шара радиуса L выражается по формуле:

$$\mathbf{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{L^3} \mathbf{r}, |\mathbf{r}| < L$$

где Q - заряд шара. Сила, действующая на протон, находящийся на границе шара, вычисляется по формуле $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$, где e - заряд электрона. Эту же силу можно рассчитать как сумму влияние шаров радиуса R , равномерно заполняющих шар радиуса L . Радиус R выбирается из условий приближенного равенства указанных сил.

Алгоритм вычисления радиуса: Начальные данные: N – количество шаров, L – радиус шара, который предполагается равным длине первой ячейки структуры, R – радиус крупных частиц, Q – заряд шара

$$Q = qN, \text{ где } q = \frac{I\lambda}{cN}$$

где λ – длина волны ВЧ поля, c – скорость света

1. Вычисляется шаг сетки, соответствующий количеству частиц N по формуле:

$$h = \frac{2L}{\sqrt[3]{N} - 1}$$

2. Определяется количество узлов сетки, попавших в шар радиуса L из условий:

$$z_i = -L + h(i - 1), x_j = -L + h(j - 1), y_k = -L + h(k - 1)$$

$$i, j, k = 1..|\sqrt[3]{N} - 1| + 1, \sqrt{z_i^2 + x_j^2 + y_k^2} \leq L$$

3. Количество частиц N изменяется до тех пор, пока количество узлов сетки, попавших в шар радиуса L , не станет равным N .
4. Фиксируются координаты узлов сетки, попавших в шар радиуса L .
5. Вычисляются силы взаимодействия частицы, расположенной в точке $(0, L, 0)$ с остальными частицами по формуле (9). Потом напряженность в точке $(0, L, 0)$ вычисляется по формуле $E_0 = \sum_{j=1}^N \frac{F_{0j}}{q}$, наконец сила действующая на протон в указанной точке $F_0 = E_0 e$.
6. Сила вычисляется по формуле:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Qe}{L^2}$$

7. Радиус шара — крупной частицы изменяется до достижения условия приближённого равенства сил.

Расчеты проведены с распределением (Рис.5 - Рис.6). Результаты численного моделирования приведены на (Рис.12, 11) . Радиус крупной частицы $R = 0.0012$.

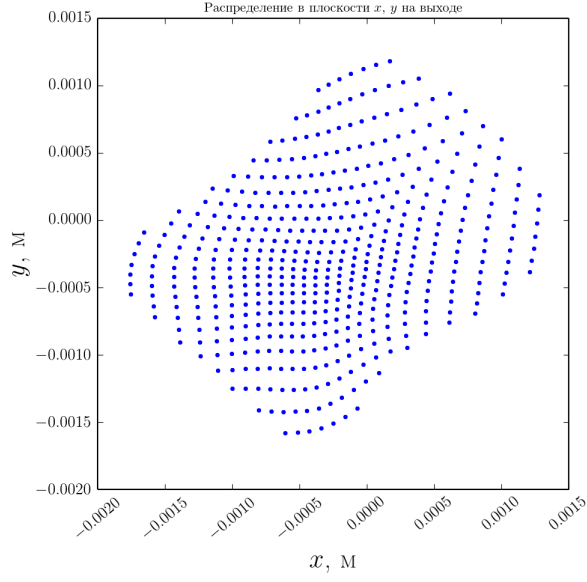
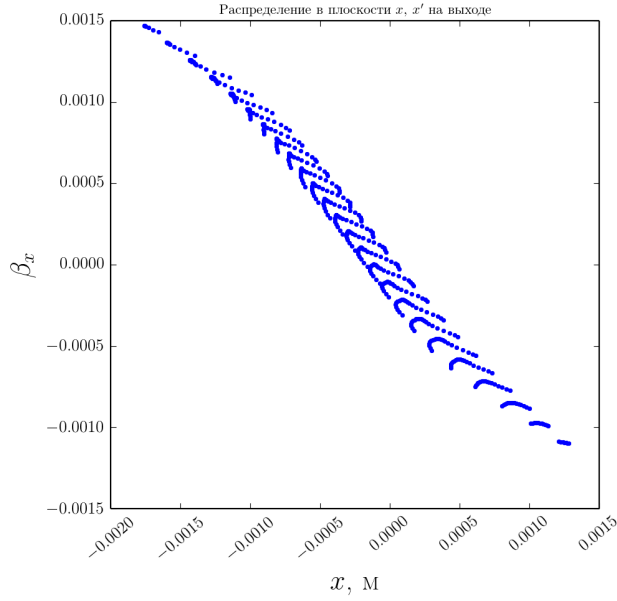
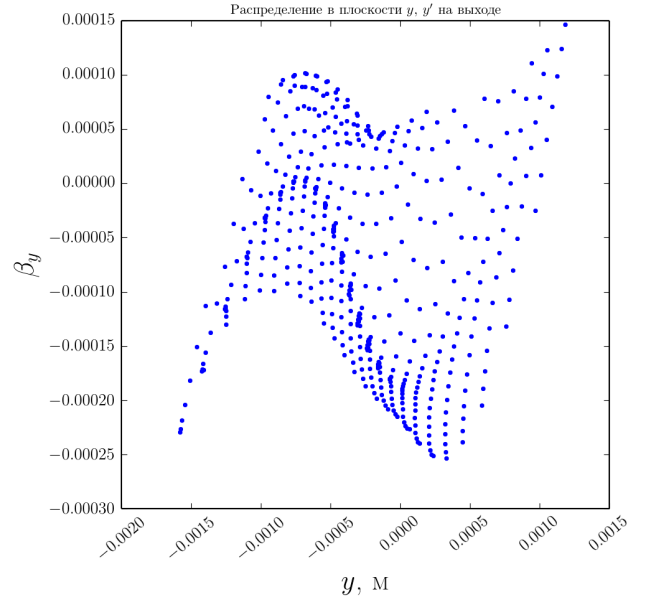


Рис. 11: Распределение частиц на выходе структуры в плоскости x, y



а)



б)

Рис. 12: а) Распределение частиц на выходе структуры в плоскости x, x' . б) Распределение частиц на выходе структуры в плоскости y, y' .

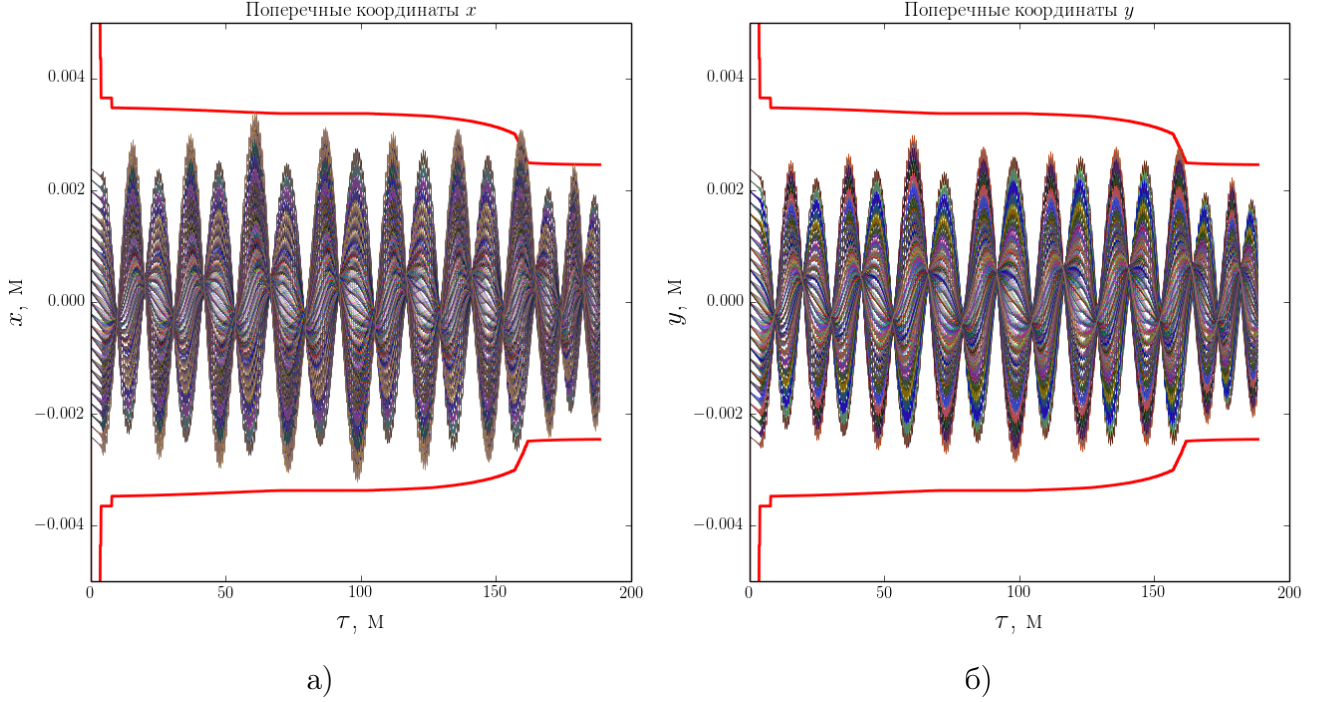


Рис. 13: а) Зависимость поперечной координаты x от приведенного времени τ . б) Зависимость поперечной координаты y от приведенного времени τ .

Модель шаров с замораживанием

Одним из важных параметров алгоритма является время исполнения. Модель шаров дает приемлемые результаты с количеством частиц порядка 10^4 [4]. Количество операций для алгоритма учета взаимодействия в модели шаров это \mathcal{N}^2 , где \mathcal{N} – количество частиц. Каждый раз, при расчете правой части, алгоритм учета взаимодействия вступает в работу. Таким образом на 1 шаг метода Рунге-Кутты 4-го порядка приходится четыре расчета правой части. Количество временных точек, при $t \in [0; 200]$ и шаге по времени $h_t = 0.1$, $n_t = 2000$. Таким образом, можно оценить количество операций, как:

$$4n_t\mathcal{N}^2 = 8 \cdot 10^{11} \quad (10)$$

Это нижняя оценка для количества операций, настоящее время будет намного больше. Операции с массивами, копирования, пересылка данных. Не стоит забывать что частицы вложены в 6-и мерное фазовое пространство, поэтому работа с памятью будет занимать много процессорного времени. Но из (10) видно, как можно повлиять на скорость работы программы.

Уменьшая количество шагов n_t на котором будет считаться взаимодействие, можно получить ускорение в несколько раз. Если же шаг метода Рунге-Кутты достаточно мал, то можно сократить количество расчета поля и в нем. Согласно (10), если вычислять его на каждом шаге метода только один раз, можно четырехкратно увеличить скорость расчета. Если, совместно с этим, считать поле через шаг по времени, то время уменьшится еще в два раза.

На Рис.14 изображены результаты испытаний, проведенные для метода шаров с замораживанием. N – «шаги замораживания», количество игнорируемых вызовов функции

правых частей. На каждом временном шаге она вызывается расчетным методом четыре раза, поэтому $N = 3$ будет говорить о том, что взаимодействие считается для каждого временного шага, но один раз в методе Рунге-Кутты. Дальнейшее увеличение числа шагов замораживания уже будет говорить о пропуске временных шагов. Так $N = 7$ говорит о пропуске одного шага, а $N = 11$ – двух и т.д. Переменная τ на оси ординат говорит о том, во сколько раз уменьшилось время расчета.

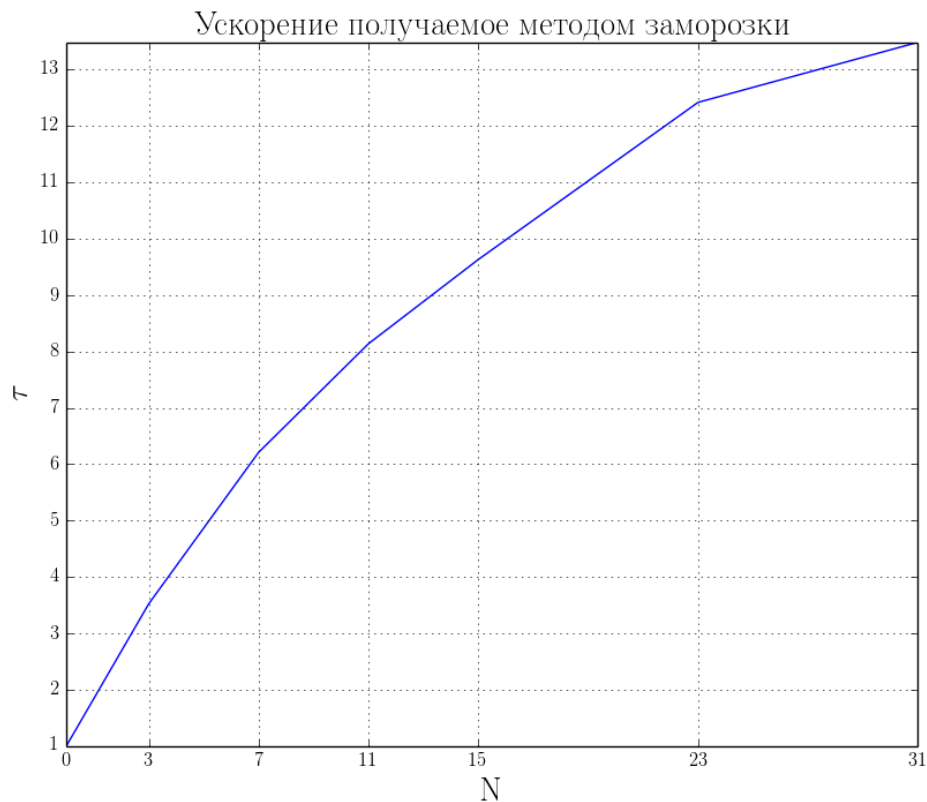
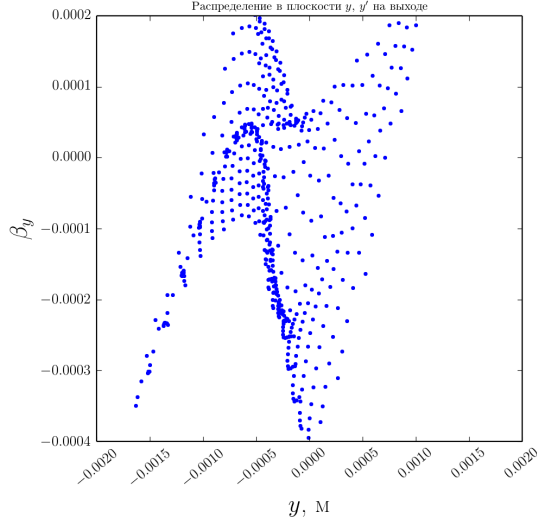
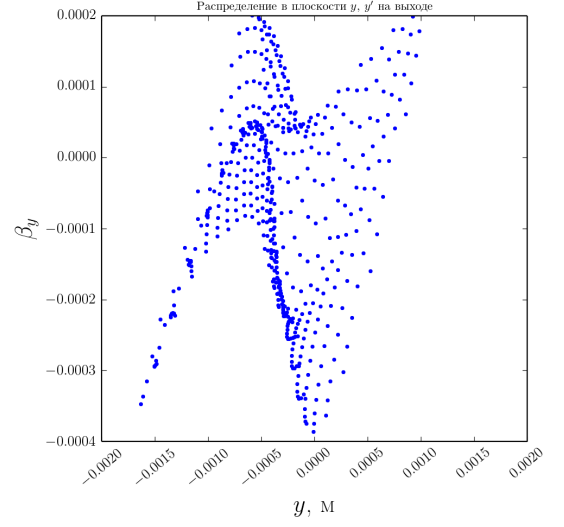


Рис. 14: Зависимость времени расчета от количество шагов замораживания.

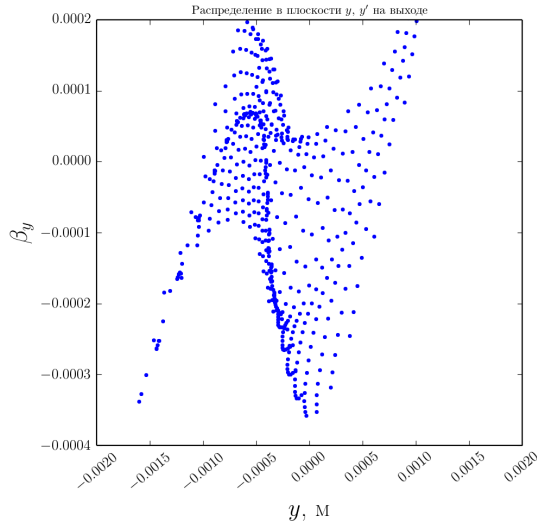
Но увеличение количества шагов заморозки неизбежно влечет за собой ухудшение точности расчета. Точности, в смысле отклонения от решения, полученного методом без заморозки частиц. Это закономерно, потому что мы игнорируем перераспределение частиц в пространстве, а вследствие этого, и кулоновских сил, действие которых моделируем. Выше уже оговорено, что при небольшом шаге метода Рунге-Кутты, возможно пренебречь изменением действующих на частицу сил, и теперь, укажем на то, что если отрезок времени достаточно мал, чтобы произошло сильное изменение положения частиц, то возможно пренебречь изменением силы взаимодействия между частицами на этом отрезке. Это говорит в пользу применения данного метода для ускорителей ионов, потому что частицы в них имеют относительно небольшие скорости. Для оценки погрешности метода, рассмотрим распределение на выходе ускоряющей структуры. Иллюстрация искажения решения в плоскости $O(y, \beta_y)$ представлена на Рис.15.



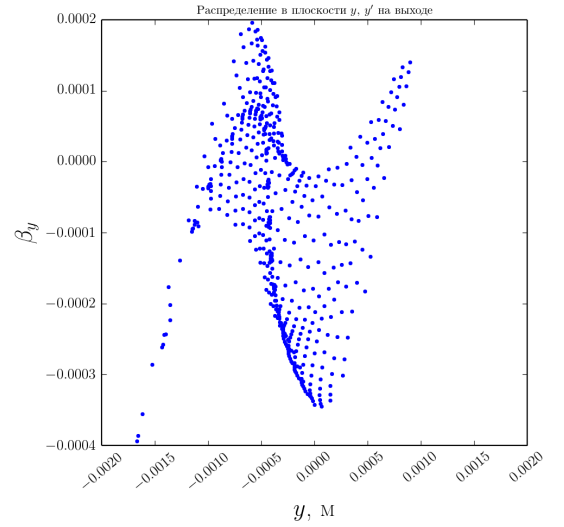
а)



б)



в)



д)

Рис. 15: Распределение модельных частиц на выходе структуры в плоскости y, y' : а) модель без заморозки, б) $N = 3$, в) $N = 15$, д) $N = 31$.

Под погрешностью понимаем отклонение решения методом заморозки, от метода без заморозки. Под *средним отклонением* будем понимать сумму вида:

$$\varepsilon_{\text{ср}}^x = \sum_{i=1}^N \frac{|x_i^0 - x_i|}{|x_i^0|} \quad (11)$$

Эта характеристика наглядно показывает во сколько раз отличается среднее решения, от эталонного. Другая характеристика, будем называть ее *абсолютным максимальным*

отклонением, вводится следующим образом:

$$\varepsilon_{\max}^x = \min_{i=1..\mathcal{N}} \left(\frac{|x_i|}{\bar{x}^0} \right), \text{ где } \bar{x}^0 = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} \frac{|x_i^0|}{\mathcal{N}} \quad (12)$$

Введение этой характеристики важно, если мы хотим отследить выбросы обусловленные моделью, и проследить максимальное отклонение от эталонного решения. В выражениях (11) - (12) значения x_i это фазовая координата i -ой частицы в исследуемом решении, x_i^0 – фазовая координата i -ой частицы эталонного решения. Знаменатель в этих выражениях позволяет получить нормированное по данной фазовой координате значение. Это необходимо для того, чтобы отклонение на разных фазовых координатах, имеющих разный порядок величин, вносило равный вклад в суммарное среднее и максимальное отклонение, которые определяются как арифметическое среднее:

$$\varepsilon_{\max} = \frac{1}{6} \sum_i^{(x,y,z,\beta_x,\beta_y,\beta_z)} \varepsilon_{\max}^i \quad (13)$$

$$\varepsilon_{\text{cp}} = \frac{1}{6} \sum_i^{(x,y,z,\beta_x,\beta_y,\beta_z)} \varepsilon_{\text{cp}}^i \quad (14)$$

На Рис.16 представлен график зависимости (13) и (14) от количества шагов замораживания. Из графика (Рис.16) видно, что среднее отклонение при количестве шагов замораживания $N = 3$ среднее отклонение всего порядка 2% от эталонного решения, при этом, такое допущение увеличивает скорость расчета более чем в три раза (Рис.14). В данном случае и максимальное отклонение будет не велико – 6%. В дальнейшем можно видеть, что максимальное отклонение растет быстрее, и при значениях $N = 11$, где $\varepsilon_{\text{cp}} \approx 0.07$ (7%), достигает значения в 20%.

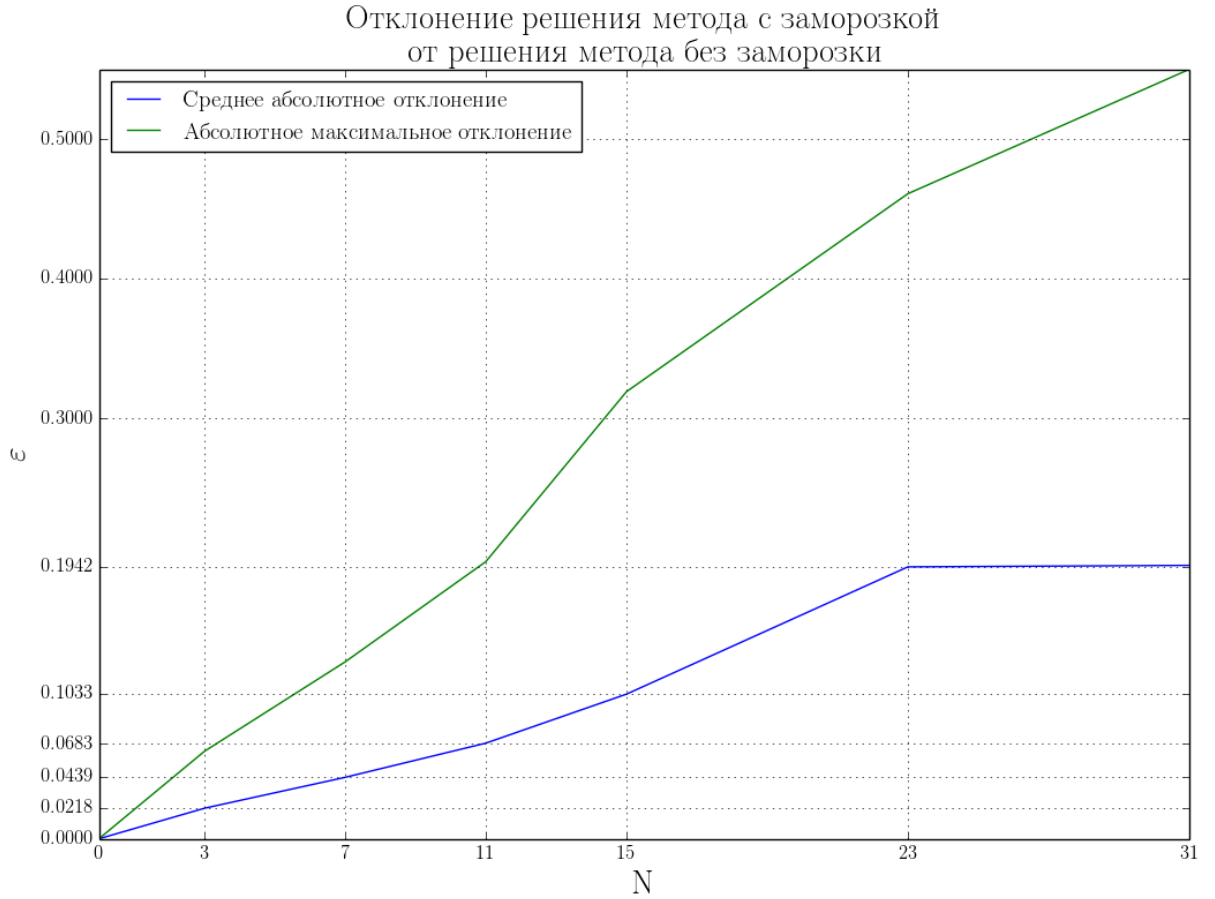


Рис. 16: Зависимость среднего и абсолютного максимального отклонения от количества шагов заморозки.

Таким образом, в зависимости от задачи по полученным данным можно ориентироваться при выборе шага. Здесь стоит заметить что выбор $N > 15$ сильно искажает решение, поэтому желательно ориентироваться на количество шагов $N = 3, 7, 11$, которые при хорошем ускорении, не выводят среднее отклонение за 10%, и оправданы на большом количестве модельных частиц.

Стоит заметить, что это модификация не изменяет асимптотическую оценку сложности алгоритма модели шаров. Она всё так же будет равна $O(\mathcal{N}^2)$. Поэтому время работы все так же будет сильно расти, с ростом количества частиц.

Выводы

В работе рассмотрены метод расчета влияния частиц пучка «частица - частица», наряду с его модификацией – метод частиц с заморозкой. Произведен сравнительный анализ полученных численных экспериментов, по результатам которого сделаны выводы о разности в скорости работы и относительной погрешности методов, и предложены параметры метода дающие наилучшие результаты. В ходе данной работы была реализована программа на языке C++ реализующая рассмотренные методы. Была выполнена ее сравнительная характеристика с существующим программным обеспечением, по результатам которой сделан вывод о корректности основного алгоритма. Приведены результаты численных экспериментов на всех реализованных моделях.

Возможно дальнейшее развитие компьютерной модели. Например, на основе беззарядной динамики можно реализовать методы типа «частица в ячейке». Реализовать поддержку многопоточности в алгоритме вычисления динамики методом Рунге-Кутты.

Заключение

В ходе выпускной квалификационной работы проделана следующая работа:

- Рассмотрены метод учета объемного заряда пучка в ускорителе с помощью модели «частица - частица», и его модификация.
- Проведена их реализация на языках программирования C++ и Python3.
- Реализована компьютерная модель трехмерной динамики с помощью указанных методов.
- Проведены численные эксперименты на исследуемых моделях, выполнено их сравнение которое позволяет сделать вывод о применимости модификации и выборе её параметров.

Таким образом в полной мере достигнуты цели, обозначенные в постановке задачи.

Список литературы

- [1] Капчинский И.М. Теория линейных резонансных ускорителей. М.: Энергоиздат, 1982. 240 с.
- [2] Капчинский И.М. Динамика частиц в линейных резонансных ускорителях. М.: Атомиздат, 1966. 305 с.
- [3] Овсянников Д.А., Свистунов Ю.А. Моделирование и оптимизация пучков заряженных частиц в ускорителях. СПб.: Науч.-исслед. ин-т прикл. химии, 2003. 104 с.
- [4] Рошаль А.С. Моделирование заряженных пучков. М.: Атомиздат, 1979. 224 с.
- [5] D. A. Ovsyannikov. Mathematical modeling and optimization of beam dynamics in accelerators. RuPAC 2012 Contributions to the Proceedings - 23rd Russian Particle Accelerator Conference PP. 68 - 72
- [6] Овсянников Д.А., Дривотин О.И. Моделирование интенсивных пучков заряженных частиц. СПб: Издательство Санкт-Петербургского университета, 2003, 176 с.